

SOLUÇÃO DE PROBLEMAS PADRÕES COM OS SISTEMAS ACOPLADOS NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION E A BIBLIOTECA JENDL-3

ADIMIR DOS SANTOS

Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares -IPEN/CNEN-SP

RESUMO

São analisados problemas padrões utilizando a biblioteca de dados nucleares JENDL-3, recentemente liberada. Os cálculos são efetuados utilizando-se a metodologia desenvolvida no IPEN/CNEN-SP, baseado no sistema acoplado composto pelos códigos NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION. A análise dos problemas padrões mostrou que o problema da superestimativa da seção de choque de captura epitérmica do U-238 ainda persiste. Por outro lado existe uma indicação que a seção de choque de fissão do U-235 esteja subestimada.

INTRODUÇÃO

Os dados nucleares constituem uma das bases científicas e tecnológicas indispensáveis ao projeto, como também, a simulação de operação de reatores nucleares. Para esse objetivo várias bibliotecas foram elaboradas e distribuídas para a utilização da comunidade nuclear nos últimos anos. Entre as bibliotecas de dados nucleares liberados ultimamente situam-se a ENDF/B-VI[1] (USA), a BROND[2] (URSS) e a JENDL-3[3] (Japan).

A Divisão de Física de Reatores do IPEN/CNEN recebeu recentemente da IAEA as bibliotecas ENDF/B-VI e a JENDL-3. Devido à não disponibilidade até o presente momento do sistema NJOY[4] versão 89 na Divisão de Física de Reatores, somente a JENDL-3 tem sido acessada para verificações da consistência e do impacto causado na solução de problemas padrões. A Divisão de Física de Reatores possui o sistema NJOY versão 10/83. A ENDF/B-VI somente é acessada com o sistema NJOY versão 89 em diante.

A biblioteca JENDL-3 foi liberada em dezembro de 1989 e foi objeto de vários testes no Instituto de Pesquisas de Energia Atômica (JAERI) do Japão. Essa biblioteca de dados nucleares substitui a versão anterior JENDL-2 e é disponível através do IAEA Nuclear Data Section.

O propósito deste trabalho é verificar o desempenho desta biblioteca de dados nucleares na análise de problemas celulares padrões, quando se utiliza o sistema acoplado NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION[5] conforme implementado na Divisão de Física de Reatores. Serão analisados o fator de multiplicação efetivo e os respectivos índices espectrais das unidades críticas das séries TRX[6] e BAPL[6] consideradas padrões pelo CSEWG. Também serão mostrados cálculos substituindo-se os dados nucleares do U-235 da JENDL-3 pelos correspondentes da ENDF/B-V. Além disso será efetuado um tratamento explícito da reação $(n,2n)$ ao invés do tratamento aproximado comumente efetuado pelo código ETOG-3[7] e implementado no sistema acoplado NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION na sua versão original[5]. Finalmente, será analisado o efeito da inclusão da contribuição do

espalhamento inelástico no termo μ_{sc} . O código ETOG-3 que elaborava a biblioteca epitérmica do sistema HAMMER-TECHNION inclui somente a contribuição do espalhamento elástico no termo μ_{sc} . Esse procedimento também foi adotado na versão original do sistema NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION.

A BIBLIOTECA DE DADOS NUCLEARES JENDL-3

A biblioteca de dados nucleares JENDL-3 foi liberada em dezembro de 1989 e representa um importante avanço na área de avaliação de dados nucleares. Essa biblioteca substitui uma versão temporária da JENDL-3 denominada de JENDL-3T[8]. A biblioteca JENDL-3 contém dados nucleares avaliados de reações com neutrons para 171 núclídeos estendendo do H-1 ao Fm255 no intervalo de energia de neutrons compreendido entre $1.0E-05$ eV a 20 MeV.

Comparativamente a JENDL-2, o escopo de dados nucleares de JENDL-3 aumentou significativamente. Além de dados nucleares de produtos de fissão para vários núclídeos, dados de produção gamma foram incluídos a biblioteca.

De interesse fundamental nesse trabalho são os dados nucleares dos núclídeos actínídeos, principalmente os do U-235 e U-238 os quais são de extrema importância na análise das unidades críticas das séries TRX e BAPL. A Tabela 1. mostra o número de ressonâncias na região de ressonâncias resolvidas e a extensão dessa região de energia do neutron. Comparativamente a biblioteca ENDF/B-IV e a JENDL-2 o detalhamento da região de ressonância resolvida do U-238 da JENDL-3 aumentou significativamente. Não somente o número de ressonâncias resolvidas é maior mas também a extensão da região de ressonância resolvida progrediu significativamente. Tabela 2 mostra a mesma comparação para o U-235.

Na elaboração da biblioteca JENDL-3 foi dada uma ênfase na região de energia rápida ($E_n > 0.8$ MeV) do neutron. Na biblioteca JENDL-3, o espectro de fissão foi obtido com o formalismo de Madland-Mix[9] ao invés do formalismo de Watt[10] comumente utilizado. Tabela 3. mostra o espectro de fissão do U-235 nos 20 primeiros grupos da estrutura de multigrupo epitérmica do HAMMER-TECHNION.

Nota-se que o espectro de fissão do U-235 da JENDL-3 é mais "duro" do que o da JENDL-2. Provavelmente isso se deve ao fato da utilização do formalismo de Madland-Nix. O fato do espectro de fissão do U-235 da JENDL-3 ser mais "duro" do que o de JENDL-2 terá várias implicações na análise dos problemas padrões. Inicialmente, como o espectro de fissão estará voltado para energias mais altas, a taxa de fuga do sistema em estudo aumentará o que implicará numa diminuição do fator de multiplicação. Por outro lado, a taxa de fissão e captura na região rápida também aumentará. O efeito final no fator de multiplicação efetivo dependerá da competição entre fuga e taxas de reação. Com relação aos índices espectrais, principalmente o ρ_{28} e o δ_{25} , haverá uma diminuição devido à mudança no espectro que estará voltado à região rápida. Convém salientar que no ρ_{28} e δ_{25} , a maior contribuição advém da região epitérmica de energia do neutron.

Tabela 4. mostra o número médio de neutrons emitidos por fissão (ν_{th}) do U-235 na região térmica de energia do neutron. Nota-se que o ν_{th} do U-235 da JENDL-3 é maior do que os correspondentes da ENDF/B-IV e JENDL-2 e menor que o ν_{th} do U-235 da ENDF/B-V. O mesmo comportamento foi observado na região epitérmica e rápida de energia do neutron. Esse aspecto será de importância na análise dos resultados obtidos dos problemas padrões analisados neste trabalho.

METODOLOGIA DE CÁLCULO

A metodologia de cálculo desse trabalho segue os mesmos passos da Referência 5 conforme o fluxograma ilustrado na Figura 1. O processamento dos dados nucleares começa com o sistema NJOY no qual são gerados para cada nuclide dois tipos de arquivos; PENDF e GENDF. Subsequentemente esse dois arquivos são formatados, respectivamente num formato compatível para o processamento do módulo ROLAIDS e na biblioteca MASTER do sistema AMPX-II. A biblioteca JENDL-3 possui para vários nuclídeos, as distribuições energéticas fornecidas no "File 5" em várias distribuições parciais com o mesmo valor de LF. De acordo com as normas do ENDF, este procedimento está correto, porém o sistema NJOY versão 10/83 não está preparado para processar esta situação. O sistema NJOY atualmente disponível na Divisão de Física de Reatores só admite um valor de LF e este valor deve ser o último. Devido a essa limitação, para cada nuclide e reação que apresentasse esse problema, o procedimento adotado foi reconstruir o FILE 5 para cada distribuição parcial individualmente, processar este arquivo com o sistema NJOY e obter a matriz final como sendo a soma das parciais.

A matriz de espalhamento do hidrogênio ligado na água foi obtida a partir das leis de espalhamento da ENDF/B-III [11]. A JENDL-3 não possui leis de espalhamento na região térmica de energia do neutron.

Tabela 1. Parâmetros de Ressonância Resolvida do U-238

Parâmetros da Ressonância Resolvida	B I B L I O T E C A - U238		
	ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3
Intervalo de energia (eV)	1.00 - 4.00E+03	1.0E-5 - 4.0E+3	1.0E-5 - 9.5E+3
Número de L	2	2	2
Número de Ressonâncias	l=0 -> 190	l=0 -> 187	l=0 -> 356
	l=1 -> 220	l=1 -> 265	l=1 -> 485
Formalismo	Single-Level Breit-Wigner	Multi-Level Breit-Wigner	Multi-Level Breit-Wigner

Tabela 2. Parâmetros de Ressonância Resolvida do U-235

Parâmetros da Ressonância Resolvida	B I B L I O T E C A - U235		
	ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3
Intervalo de energia (eV)	1.00 - 8.20E+01	1.00 - 1.00E+2	1.00 - 1.00E+2
Número de L	1	1	1
Número de Ressonâncias	l=0 -> 130	l=0 -> 148	l=0 -> 148
	Single-Level Breit-Wigner	Single-Level Breit-Wigner	Single-Level Breit-Wigner

Tabela 3. Espectro de Fissão do U-235 nos 20 Primeiros Grupos da Estrutura Epitérmica do HAMMER-TECHNION

Grupo	JENDL-2	JENDL-3	ENDF/B-V
1	8.636E-03	5.409E-03	7.152E-03
2	1.958E-02	1.788E-02	1.881E-02
3	4.136E-02	4.120E-02	4.215E-02
4	6.852E-02	7.180E-02	7.172E-02
5	9.369E-02	1.005E-01	9.863E-01
6	1.102E-01	1.185E-01	1.152E-01
7	1.150E-01	1.220E-01	1.186E-01
8	1.100E-01	1.138E-01	1.114E-01
9	9.730E-02	9.747E-02	9.688E-02
10	8.171E-02	7.950E-02	8.003E-02
11	6.594E-02	6.214E-02	6.325E-02
12	5.085E-02	4.705E-02	4.845E-02
13	3.843E-02	3.492E-02	3.623E-02
14	2.839E-02	2.551E-02	2.652E-02
15	2.068E-02	1.842E-02	1.918E-02
16	1.485E-02	1.314E-02	1.369E-02
17	1.059E-02	9.315E-03	9.722E-03
18	7.452E-03	6.521E-03	6.813E-03
19	5.241E-03	4.567E-03	4.778E-03
20	3.661E-03	3.178E-03	3.330E-03

Tabela 4. Valores de ν do U-235

ENDF/B-IV	JENDL-2	JENDL-3	ENDF/B-V
2.4188	2.4286	2.4361	2.4367

Em todos os problemas analisados nesse trabalho o efeito da autoblindagem mútua das ressonâncias dos núcleos actíneos foi levado em consideração pelo módulo ROLAIDS do sistema AMPX-II. O tratamento explícito da reação (n,2n) foi feita da seguinte forma : adicionou-se a matriz de espalhamento dessa reação duas vezes à matriz de espalhamento inelástico. O termo μ_{σ} do espalhamento inelástico é obtido a partir do primeiro momento da matriz de espalhamento inelástico. Esse termo foi adicionado ao correspondente termo devido ao espalhamento elástico e incluído na biblioteca do HAMMER-TECHNION. O fator de multiplicação efetivo e os respectivos índices espectrais são finalmente calculados com a versão modificada do código HAMMER-TECHNION.

RESULTADOS OBTIDOS

Considere inicialmente o efeito do tratamento explícito da reação (n,2n) e a inclusão da contribuição do espalhamento inelástico no termo μ_{σ} , no fator de multiplicação efetivo e nos índices espectrais da unidade crítica TRX-1. Tabela 5

mostra esses resultados com a utilização da JENDL-3. Também são mostrados na Tabela 5. os resultados obtidos quando se utiliza as opções Carlvik e Standard para execução do programa THERMOS do sistema HAMMER-TECHNION.

O tratamento explícito da reação (n,2n) tem maior impacto no índice espectral ρ_{28} . Isso porque, no tratamento originalmente efetuado, a seção de choque da reação (n,2n) é subtraída uma vez da seção de choque de captura. A inclusão do espalhamento inelástico no termo μ_{σ} tem maior impacto no fator de multiplicação efetivo com a tendência na direção correta. O fator de multiplicação efetivo calculado com a contribuição do espalhamento inelástico no termo μ_{σ} diminui visto que a taxa de fuga do sistema aumenta. Com relação a utilização das opções Carlvik e Standard no programa THERMOS, nota-se que a opção Standard THERMOS tem a tendência de subestimar o Keff e superestimar os índices espectrais em relação a opção Carlvik.

Do ponto de vista matemático, a opção Carlvik é mais precisa do que a opção Standard. Em todas as comparações feitas a seguir os cálculos com o HAMMER-TECHNION serão efetuados com a opção Carlvik, com a

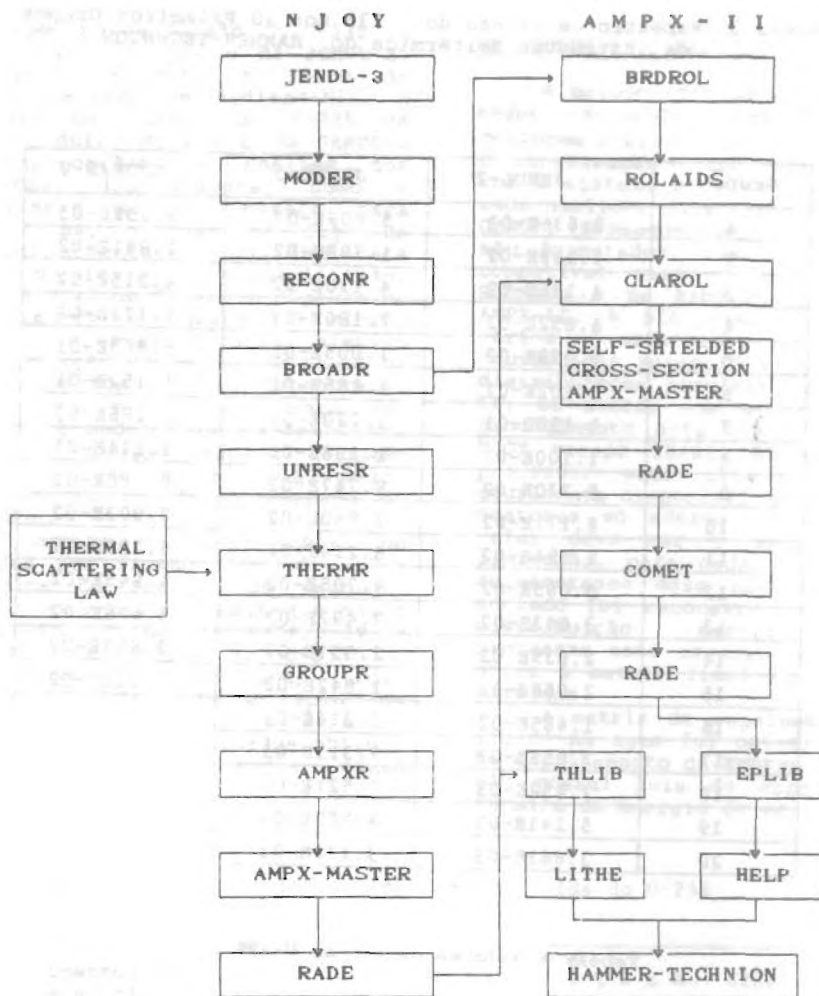


Figura 1. - Metodologia de Cálculo

reação (n,2n) tratada explicitamente e com a inclusão do espalhamento inelástico no termo μ_{0s} . Dessa forma todos os cálculos efetuados com o sistema HAMMER-TECHNION serão efetuados da forma mais representativa possível.

Tabela 6 mostra os fatores de multiplicação efetivo e os respectivos índices espectrais das unidades críticas BAPL e TRX expressos em termos da razão calculado sobre experimental, obtidos em três situações distintas. Nas duas primeiras situações denominadas de JENDL-3 e J3+B5 utilizou-se a metodologia de cálculo desse trabalho. Na primeira situação todos os dados nucleares provêm da biblioteca JENDL-3. Na segunda situação, substitui-se os dados nucleares do U-235 da JENDL-3 pelos dados nucleares do U-235 da ENDF/B-V conservando os dados nucleares dos demais núcleos da biblioteca JENDL-3. A terceira situação denominada de ENDF/B-V foi extraída da literatura[12] e é mostrada apenas para efeitos comparativos.

Considere inicialmente o fator de multiplicação efetivo. Nota-se que o keff calculado com a JENDL-3 encontra-se subestimado em todos os problemas padrões. Em grande parte isso se deve ao fato do ρ_{2s} estar superestimado.

O ρ_{2s} é uma boa indicação da qualidade dos dados nucleares e métodos de cálculo na região de ressonância resolvida. Se a taxa de

reação na região de ressonância resolvida for superestimada, o Keff será subestimado a menos que outros fatores compensem esse efeito. Outros fatores que podem contribuir para o fato do Keff calculado com a JENDL-3 se apresentar subestimado são o valor de ν_{th} e o espectro de fissão. Os keffs calculados com a biblioteca J3+B5 encontram-se em melhor concordância mas isso se deve basicamente ao melhor desempenho do δ_{2s} do U-235 da ENDF/B-V. Deve-se observar que o comportamento dos Keffs das bibliotecas JENDL-3 e J3+B5 em função do pitch segue o mesmo comportamento do Keff obtido da literatura com a biblioteca ENDF/B-V.

O ρ_{2s} calculado com a biblioteca JENDL-3 encontra-se superestimado e conforma mostrado nas unidades da série BAPL, este índice espectral tem a tendência de possuir o maior desvio em relação ao valor experimental na unidade crítica próxima ao pitch ótimo (maior K_{∞}) e de decrescer esse desvio a partir deste ponto. O mesmo comportamento é observado para as demais bibliotecas. O ρ_{2s} calculado com a biblioteca J3+B5 encontra-se levemente em melhor concordância em relação ao valor experimental, e também indica que o efeito da autoblindagem mútua é uma função de todos os núcleos que compõem a célula unitária. Note que ao trocar os dados nucleares na região epitérmica do U-235 houve uma mudança no valor de ρ_{2s} . Esse aspecto é

Tabela 5. Keff e Índices Espectrais da Unidade Crítica TRX-1

Parâmetros Calculados	TRX-1		JENDL-3	
	C A R L V I K			
	CASO-A ^(a)	CASO-B ^(b)	CASO-C ^(c)	EXP.
Keff	0.9957	0.9943	0.9931	
ρ_{28}	1.3335	1.3440	1.3440	1.320 ± 0.001
δ_{25}	0.0940	0.0940	0.0940	0.0987 ± 0.001
δ_{28}	0.0990	0.0981	0.0980	0.0946 ± 0.0041
Parâmetros Calculados	S T A N D A R D			
	CASO-A ^(a)	CASO-B ^(b)	CASO-C ^(c)	EXP.
	CASO-A ^(a)	CASO-B ^(b)	CASO-C ^(c)	EXP.
Keff	0.9936	0.9921	0.9910	
ρ_{28}	1.3380	1.3484	1.3484	1.320 ± 0.021
δ_{25}	0.0941	0.0940	0.0940	0.0987 ± 0.001
δ_{28}	0.0990	0.0982	0.0982	0.0946 ± 0.0041

a) Procedimento original

b) (n,2n) explícito

c) (n,2n) explícito e μ_{0s} com contribuição do espalhamento inelástico

Tabela 6. Keff e Índices Espectrais das Unidades Críticas das Séries BAPL e TRX

Problemas Padrões		BAPL-1	BAPL-2	BAPL-3	TRX-1	TRX-2
Parâmetros Calculados ^(a)						
Keff	JENDL-3	0.99430	0.99597	0.99792	0.99318	0.99549
	J3 + B5 ^(b)	0.99953	1.00075	1.00237	0.99649	0.99889
	ENDF/B-V ^(c)	1.0028	1.0031	1.0055	0.9961	0.9984
ρ_{28}	Exp.	1.39 ± 0.01	1.12 ± 0.01	0.906 ± 0.001	1.320 ± 0.021	0.837 ± 0.016
	JENDL-3	1.02770	1.05543	1.01633	1.01815	1.00165
	J3 + B5	1.02428	1.05286	1.01663	1.01898	0.99930
	ENDF/B-V	1.01727	1.04732	1.0088	1.02954	1.01075
δ_{25}	Exp.	0.084 ± 0.02	0.068 ± 0.001	0.052 ± 0.001	0.0987 ± 0.001	0.0614 ± 0.0008
	JENDL-3	0.95274	0.95809	0.96096	0.95218	0.93795
	J3 + B5	0.97303	0.97842	0.98118	0.97372	0.95873
	ENDF/B-V	1.0000	1.0000	1.0096	1.01611	1.0000
δ_{28}	Exp.	0.078 ± 0.004	0.070 ± 0.004	0.057 ± 0.003	0.0946 ± 0.0041	0.0693 ± 0.0035
	JENDL-3	0.98462	0.94229	0.94719	1.03515	1.00188
	J3 + B5	0.97316	0.93177	0.93712	1.03131	0.99705
	ENDF/B-V	0.97692	0.93286	0.9351	1.04545	1.0086

(a) Expressos em calculado sobre experimental (C/E)

(b) U-235 da ENDF/B-V, demais núclídeos da JENDL-3

(c) Obtido da Literatura (Ref.12)

importante ao analisar índices espectrais porque a taxa de reação de um determinado nuclídeo não é somente uma função dos dados nucleares desse nuclídeo mas também dos dados nucleares dos demais nuclídeos.

O δ_{25} calculado com a biblioteca JENDL-3 encontra-se subestimado e sugere uma forte indicação de que a seção de choque de fissão U-235 esteja subestimada. Esse aspecto é refletido no comportamento do Keff. A mesma conclusão foi obtida por Takano et al. [13] na análise dos problemas padrões da série ORNL [6]. O δ_{25} calculado com a biblioteca J3+B5 encontra-se em melhor concordância com os valores experimentais.

O δ_{28} calculado com a biblioteca JENDL-3 encontra-se subestimado nos problemas padrões da série BAPL e superestimado na série TRX. O mesmo comportamento é observado para o δ_{28} calculado com a biblioteca J3+B5 e os respectivos valores extraídos da literatura com o ENDF/B-V.

CONCLUSÃO

Pela análise efetuada nesse trabalho pode-se concluir que :

a) a terceira versão da biblioteca japonesa JENDL aumentou seu escopo de dados nucleares, não somente em termos de números de nuclídeos mas também em termos de detalhamento dos dados nucleares em si. Exemplo típico desse detalhamento é a extensão da região de ressonância resolvida do U-238 e o número de ressonâncias para descrever essa região. Em contra-partida o processamento dos dados nucleares do U-238 requer maior esforço computacional do que o correspondente da versão anterior.

b) a metodologia de cálculo utilizado nesse trabalho produziu resultados para o fator de multiplicação efetivo e índices espectrais com o mesmo tipo de comportamento do que os obtidos com métodos mais poderosos conforme mostrado na tabela 6. Os resultados extraídos da literatura utilizando a ENDF/B-V são produzidos com o tratamento explícito dos problemas padrões utilizando o método de Monte Carlo. Esse aspecto reforça a validade das conclusões obtidas nesse trabalho.

c) o problema da superestimativa dos dados nucleares na região de ressonância resolvida do U-238 ainda persiste na versão da biblioteca JENDL-3. Muito embora esteja em melhor concordância do que os resultados obtidos com o ENDF/B-IV [12] por exemplo ainda deixa muito a desejar para utilização rotineira em projetos de reatores nucleares térmicos.

d) pela análise do δ_{25} e do Keff existe uma forte indicação de que a seção de choque de fissão do U-235 da JENDL-3 esteja subestimada. Para análise de outros experimentos críticos a melhor opção é substituir os dados nucleares da JENDL-3 pelos correspondentes do ENDF/B-V.

Como sugestões para trabalho posterior sugere-se a análise de problemas celulares padrões que contenham óxido misto ($\text{PuO}_2\text{-UO}_2$) para acessar a qualidade dos dados nucleares dos isótopos do plutônio da JENDL-3.

REFERÊNCIAS

- [1] Lemmel, H.D., "ENDF/B-VI, The U.S. Evaluated Nuclear Data Library for Neutron Reaction Data", IAEA-NDS-100, June-1990
- [2] Lemmel, H.D., IAEA-NDS-90, June 1990
- [3] K. Shibata, et al.; "Japanese Evaluated Nuclear Data Library Version 3 - JENDL-3"; JAERI-1319 (1990)
- [4] MacFarlane, P.E., et al., "The NJOY Nuclear Data Processing System: User's Manual", Los Alamos Scientific Laboratory report LA-7584-MS (1978)
- [5] Ferreira, C.R., Santos, A., "Análise de Criticalidade Utilizando-se os Sistemas NJOY, AMPX-II e KENO-IV", Anais do VII ENFIR, Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, Vol-I, pág. 215-225, Recife-PE, Brasil, 1989.
- [6] Cross Section Evaluation Working Group Benchmark Specification, ENDF-202 (BNL-19302)
- [7] Barhen, J. et al., "The HAMMER Code System", EPRI-NP-565, October 1978.
- [8] Takano, H., Kaneko, K., Proc. Int. Conf. Nuclear Data for Sci. and Technol., Mito, p.512, May 1988.
- [9] Madland, D.G., Nix, J.R., Nuclear Sci. Eng. 81, p.213 (1982)
- [10] Garber, D.C., et al., "Data Formats and Procedures for the Evaluated Nuclear Data File, ENDF", BNL-NCS-50496, Oct. 1982
- [11] Koppel, J.U., Houston, D.H., "Reference Manual for ENDF Thermal Neutron Scattering Data", GA-8774, Dec. 1968.
- [12] Hardy, J., "ENDF/B Data Testing Results for Thermal Reactor Benchmarks", Proceedings of Thermal Reactors Benchmark Calculations: Techniques, Results and Applications, Bettis Atomic Power Laboratory, Pittsburgh, EPRI-NP-2885, Feb. 1983.
- [13] Takano, H., et al., "Benchmark Tests of JENDL-3 for Thermal and Fast Reactors", Proc. of The International Conference on The Physics of Reactors: Operation, Design and Computation., Physor-90, Vol-3, p.21, Marseille - France, April 1990.

SUMMARY

Benchmark calculations were performed with the newest released Japanese nuclear data library JENDL-3. The calculations were performed with the methodology developed at IPEN/CNEN-SP based on a coupled NJOY/AMPX-II/HAMMER-TECHNION system. The analyses show that the long-standing problem of the overprediction of the epithermal U-238 neutron capture still remains. Besides that there is an indication that the fission cross section of U-238 might be underestimated.